

УДК 51-74:519.711:519.714:666.972.7

А. Н. Бормотов, кандидат технических наук, доцент, Пензенская государственная технологическая академия
И. А. Прошин, доктор технических наук, профессор, Пензенская государственная технологическая академия
А. В. Васильков, ОАО «НПП «Рубин», Пенза

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ЛИОФОБНЫХ СИСТЕМ*

Предлагается система компьютерного и имитационного моделирования композитов, включающая в себя методики проведения численного и натурального экспериментов, методы моделирования структурообразования, алгоритмы и комплекс программ, позволяющая установить влияние основных рецептурно-технологических факторов на процесс структурообразования лиофобных дисперсных систем и подтверждающая адекватность полученных качественных аналитических решений.

Ключевые слова: математические модели, моделирование, компьютерное моделирование, управление качеством, многокритериальный синтез, структурообразование, композиционные материалы.

В лиофобных системах потенциал парного взаимодействия имеет два интервала монотонности – интервал убывания при $r_{ij} < r_o$ и интервал возрастания при $r_{ij} > r_o$. Сила парного взаимодействия также имеет два интервала монотонности.

В качестве потенциала принята функция потенциала Леннарда – Джонса [1]:

$$U(r_{ij}) = U_o \left(\left(\frac{r_o}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_o}{r_{ij}} \right)^6 \right), \quad (1)$$

где r_{ij} – расстояние между поверхностями частиц; U_o – характерная энергия взаимодействия; r_o – расстояние, соответствующее положению равновесия.

Участок отталкивания соответствует расстояниям

$r_{ij} < \frac{\sqrt[6]{637}}{\sqrt{7}} r_o$, участок притяжения – расстояниям

$r_{ij} > \frac{\sqrt[6]{637}}{\sqrt{7}} r_o$ (рис. 1).

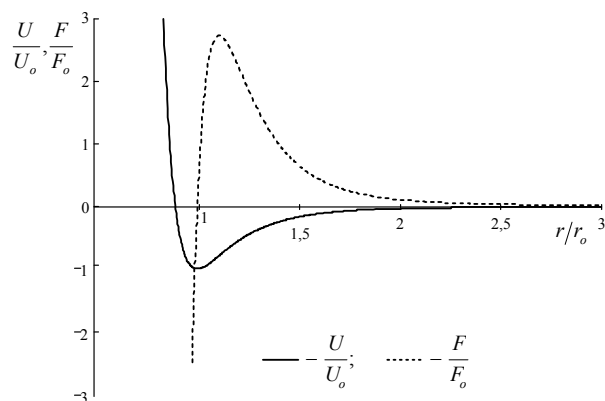


Рис. 1. Потенциал U и сила F парного взаимодействия для лиофобных систем

Для исследования эволюции дисперсных систем разработано не имеющее аналогов ПО. Программный продукт является автономным (не требует для работы других пакетов численного анализа) и реализован на стандартном языке ANSI C (ANSI X3.158–1989) для операционных систем Windows NT/2000/XP, а также POSIX-совместимых вычислительных платформ.

Исполнение ПО начинается с синтаксического анализа командной строки, в которой передается имя управляющей программы.

Управляющая программа содержит текстовое описание моделируемой системы, в котором, в свою очередь, должны быть определены общие параметры системы (число сферических частиц, распределение их по размерам и плотности), начальные условия (пространственное распределение частиц), расположение и вид границ (плоскости, сферы), вид функций парного взаимодействия и взаимодействия с границами, численные значения коэффициентов, входящих в выражения для функций взаимодействия. Данная информация инкапсулируется в объекте, содержащем описание системы частиц.

Процесс моделирования начинается с создания объекта мониторинга, один из методов которого периодически вызывается в процессе решения. В данном объекте реализованы в частности процедуры статистического анализа и графического отображения результатов.

Текущее значение состояния дисперсной системы используется для графического представления результатов расчета, а также для автоматической генерации программ на входном языке пакета 3D Studio MAX. После завершения расчета, полученные программы используются для создания растрового изображения моделируемой дисперсной системы.

Графические представления взаимного расположения частиц достаточно наглядны, однако не позволяют сделать выводы относительно значений характерного времени структурообразования и характерных перемещений частиц в процессе эволюции

© Бормотов А. Н., Прошин И. А., Васильков А. В., 2011

Получено 13.04.11

* Работа выполнена при поддержке гранта АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2009–2011 годы)» на тему «Математическое моделирование и многокритериальный синтез строительных материалов специального назначения». Рег. № 2.1.2/11488.

дисперсной системы. Оценить указанные параметры можно только на основе статистического анализа изменения положений частиц.

Для этого целесообразно использовать следующие показатели:

$$R_{4av} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R_{4i}; \quad R_{4std} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (R_{4i} - R_{4av})^2};$$

$$Nn_{av} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Nn_i; \quad Nn_{std} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (Nn_i - Nn_{av})^2};$$

$$Ns_{av} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K Ns_k; \quad Ns_{std} = \sqrt{\frac{1}{K-1} \sum_{k=1}^K (Ns_k - Ns_{av})^2},$$

где R_{4i} – расстояния от поверхности i -й частицы ($i = \overline{1, N}$, N – число частиц) до поверхности четырех ближайших частиц (для i -й частицы усреднение проводится по числу ближайших); R_{4av} , R_{4std} – соответственно, оценки среднего и среднего квадратичного отклонения расстояния от i -й частицы ($i = \overline{1, N}$) до четырех ближайших к ней; Nn_i – число частиц, расстояние до поверхности которых (от поверхности i -й частицы) не превышает заданного значения; Nn_{av} , Nn_{std} – соответственно, оценки среднего и среднего квадратичного отклонения числа частиц, расстояние до которых от данной не превышает заданного значения; Ns_k – число частиц, находящихся в k -й подобласти ($k = \overline{1, K}$, K – число подобластей) выпуклой оболочки всех N частиц; Ns_{av} , Ns_{std} – соответственно, оценки среднего и среднего квадратичного отклонения числа частиц, находящихся в k -й подобласти ($k = \overline{1, K}$) выпуклой оболочки всех частиц; K – число подобластей.

Для нахождения числа частиц Ns_k производилось построение ограничивающего прямоугольного параллелепипеда, который затем разделялся на 27 равных подобластей.

Численный эксперимент был выполнен для десяти лиофобных дисперсных систем, характеристики которых приведены в таблице. Начальное распределение частиц подчинено закону равномерной плотности. Частицы распределялись внутри сферы, радиус R_b которой связан с объемной степенью заполнения v_f :

$$R_b = R_f \sqrt[3]{\frac{N}{v_f}}, \quad (2)$$

где R_f – радиус частицы; N – число частиц.

Число частиц во всех системах было выбрано равным 100, диаметр частиц составлял 1 мкм, вязкость дисперсионной среды – 10^{-8} Па·с. В системах № 1...8 граничные поверхности отсутствовали. В системе № 9 граничной поверхностью являлась сфера радиусом 17 мкм, в системе № 10 – сфера радиусом 25 мкм.

В работе [2] при рассмотрении предельных систем получены оценки времени, требуемого для перемещения частиц (на расстояния, сравнимые по порядку величины с их размерами), под действием сил парного взаимодействия, потенциал которых имеет вид функции (1).

Характеристики моделируемых лиофобных систем

№ системы	R_b , мкм	v_f	U_{0i} , Дж	r_o , нм
1	2	3	4	5
1	10	0,1	10^{-23}	1
2	10	0,1	10^{-23}	10
3	10	0,1	10^{-23}	100
4	10	0,1	10^{-23}	1000
5	10	0,1	10^{-25}	1000
6	10	0,1	10^{-26}	1000
7	15	0,03	10^{-23}	1000
8	22	0,01	10^{-23}	1000
9	15	0,03	10^{-23}	1000
10	22	0,01	10^{-23}	1000

Результаты численных экспериментов согласуются с полученными оценками времени. При $r_o \sim R_f/1000$ конфигурация частиц остается неизменной на протяжении более чем 8 часов (что многократно превышает длительность периода твердения композитов специального назначения).

При увеличении r_o на порядок (до $R_f/100$) статистический анализ позволяет выявить перемещения частиц. Однако эти перемещения существенно меньше размера частиц и не приводят к изменению конфигурации системы (рис. 2).

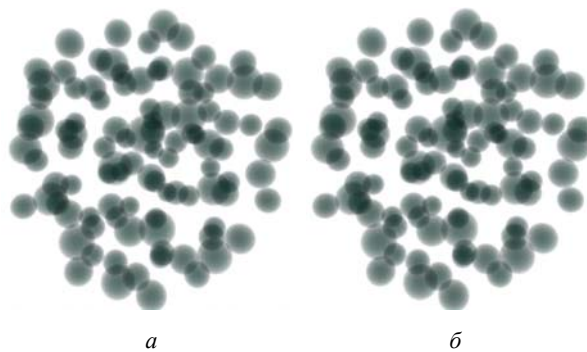


Рис. 2. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 2

При дальнейшем увеличении расстояния r_o время изменения конфигурации уменьшается до значений, сравнимых с длительностью процесса структурообразования.

В процессе эволюции системы № 3 формируются флокулярные образования, на что указывает уменьшение среднего расстояния R_4 между частицами. Однако данные образования состоят из небольшого числа частиц (рис. 3), поэтому эволюция сопровождается снижением однородности локальных участков. При этом значение среднего квадратичного отклонения числа Ns частиц в подобластях указывает на незначительное изменение однородности системы.

При r_o , сопоставимом с размером частиц, эволюция системы протекает чрезвычайно быстро и завершается в течение нескольких секунд. Частицы занимают положения, при которых достигается локальный минимум потенциальной энергии ($R_{4av} = r_o$), следовательно, в состав флюккулярных образований входит большинство частиц.

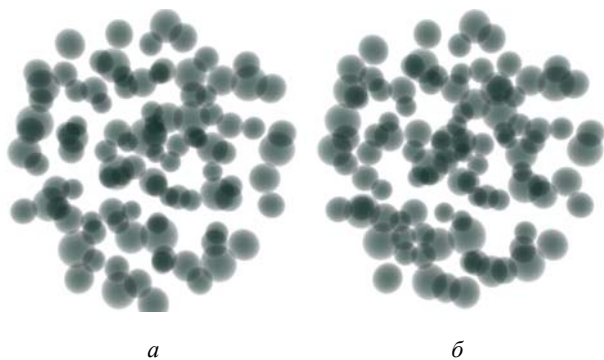


Рис. 3. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 3

В отличие от системы № 3 эволюция системы № 4 сопровождается увеличением однородности локальных участков (снижение среднего квадратичного отклонения расстояния R_4). Возрастание среднего квадратичного отклонения N_{Std} числа частиц в подобластях (от 1,6 до 2,0) позволяет сделать вывод об образовании флюкул, что сопровождается снижением однородности системы (рис. 4).

При выбранном потенциале парного взаимодействия (1) расстояние r_o до положения равновесия является основным фактором, определяющим время эволюции системы. Глубина потенциальной ямы U_o оказывает меньшее влияние. Снижение U_o на два порядка (от 10^{-23} до 10^{-25} Дж) при переходе от системы № 4 к системе № 5 сопровождается возрастанием характерного времени структурообразования до 50 с, что только на порядок превышает соответствующее время для системы № 4. В то же время изменение расстояния r_o на два порядка (переход от системы № 4 к системе № 2) сопровождается увеличением характерного времени до значений, существенно превышающих 10^4 с.

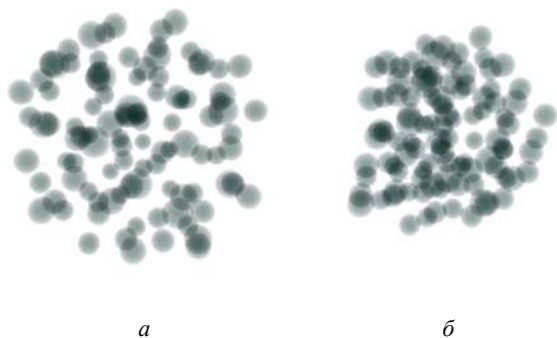


Рис. 4. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 4

Следует также отметить, что изменение глубины потенциальной ямы в отличие от изменения ее положения не приводит к принципиальным отличиям в характере эволюции локальных участков системы (рис. 3 и рис. 4). Как и в случае системы № 4, среднее квадратичное отклонение расстояния R_4 в процессе эволюции снижается.

Однако уменьшение энергии U_o приводит к формированию структуры, отличающейся большей однородностью: конфигурация частиц дисперсной фазы в системе № 5 аналогична распределению частиц в системах № 2 и 3, для которых среднее квадратичное отклонение числа частиц N_s в подобластях сохраняет постоянное значение.

Дальнейшее уменьшение глубины потенциальной ямы до 10^{-26} Дж приводит к увеличению характерного времени эволюции и снижению однородности локальных участков. Установившееся значение среднего квадратичного отклонения расстояния R_4 в системе № 6 существенно выше, чем в системах № 4 и 5 (рис. 4 и 5). При этом уменьшается доля частиц, входящих во флюккулярные образования. Установившиеся значения $N_{s,av}$ в системах № 4, 5 и 6 совпадают, но окончательная конфигурация частиц в системе № 6 несколько менее плотная, чем в системах № 4 и 5 (рис. 4 и 5).

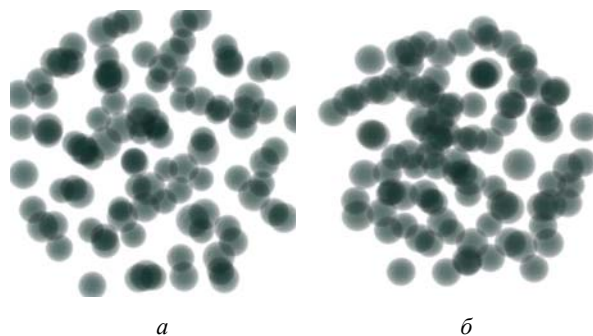


Рис. 5. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 5

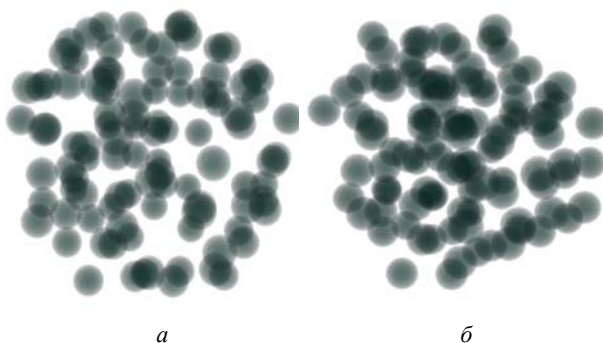


Рис. 6. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 6

При объемной доле дисперсной фазы $v_f \leq 0,03$ (переход от системы № 4 к системе № 7) процесс структурообразования можно разделить на три стадии (соответствующие стадии можно выделить и для системы № 5, однако в последнем случае они выра-

жены слабо). Первые две стадии условно можно назвать локальной и глобальной, а третью – стадией установления.

В течение локальной стадии структурообразования происходит формирование большого числа слабо связанных между собой флокул. В эти образования входят частицы, которые в исходной конфигурации находились достаточно близко друг к другу. Формирование флокул сопровождается существенным уменьшением значения R_{4av} (время от 0 до 10 с). К концу локальной стадии однородность отдельных участков системы невысока (показатель R_{4std} сохраняет высокое значение), что является следствием иррегулярности флокул, сформировавшихся на локальной стадии: даже в малых областях частицы находятся в положениях, не соответствующих минимуму потенциальной энергии.

Формирование не связанных между собой флокул (рис. 7, а и б) сопровождается снижением однородности системы в целом.

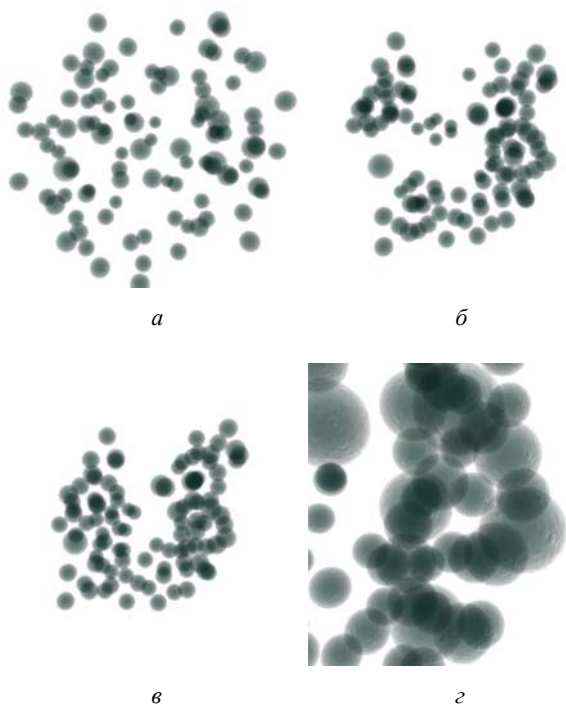


Рис. 7. Конфигурации частиц в системе № 7: а – исходная; б – завершение локальной стадии; в – завершение глобальной стадии; г – фрагмент перколяционного каркаса на стадии установления

В течение глобальной стадии происходит постепенное сближение флокул и увеличение их плотности (рис. 7, б и в). Среднее расстояние R_{4av} сохраняет практически постоянное значение: уменьшение его на локальной стадии составляло около 40 %, а в течение глобальной стадии R_{4av} уменьшается только на 12 %. Однако регулярность флокул существенно возрастает: среднее квадратичное отклонение R_{4av} снижается примерно на 25 % от первоначального значения. На протяжении глобальной стадии однородность системы сравнительно невысока (время от 10 до 120 с).

Глобальная стадия завершается формированием непрерывного связного каркаса, в который входят практически все дисперсные частицы (рис. 7, в и г). Формирование каркаса сопровождается увеличением однородности локальных участков и системы в целом. На стадии установления конфигурация частиц не претерпевает заметных изменений.

Уменьшение объемной доли дисперсной фазы до $v_f = 0,01$ приводит к увеличению длительности локальной стадии более чем на порядок (от 10 с для системы № 7 до 200 с для системы № 8). При переходе к системе № 8 несколько меняется характер локальной стадии: флокулярные образования имеют меньшую плотность и в них входит небольшая часть частиц. Локальная стадия сопровождается снижением однородности отдельных участков и системы в целом.

Образовавшиеся флокулы находятся на значительном расстоянии друг от друга, поэтому глобальная стадия для системы № 8 слабо выражена, и к моменту окончания эксперимента связный каркас не сформирован (рис. 8).

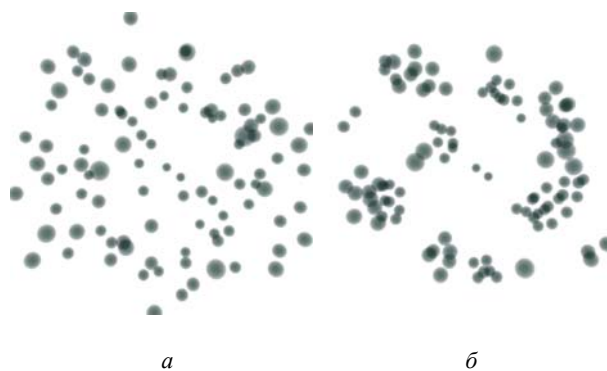


Рис. 8. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 8

Взаимодействие с граничной поверхностью, определяемое потенциалом вида (1), приводит к разрушению трехмерных флокулярных образований. Частицы в системах № 9 и 10 распределяются по граничной сфере, формируя двумерные флокулярные структуры на ее поверхности (рис. 9 и 10). Единственной энергетически выгодной пространственной структурой является четырехугольная пирамида, основание которой параллельно границе. Однородность локальных участков системы № 9 меньше, чем системы № 7. На это указывает сравнительно высокое значение R_{4std} – около 1,2 мкм, в то время как для системы № 7 аналогичный показатель на 0,4 мкм меньше. О меньшей плотности локальных участков системы № 9 свидетельствует значительное среднее расстояние R_{4av} – 1,8 мкм (для системы № 7 – около 1,1 мкм).

В отличие от системы № 7 в процессе эволюции системы № 9 нельзя выделить характерные стадии. Формирование двумерных флокулярных образований происходит в основном после того, как частицы занимают положения, соответствующие минимуму

потенциала поля граничной сферы. Движение частиц после этого момента происходит по поверхности сферы, поэтому пространственный связный каркас не формируется, и установившееся значение $N_{S_{std}}$ практически не отличается от первоначального.

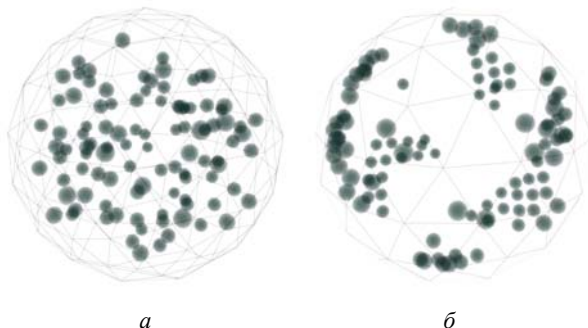


Рис. 9. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 9

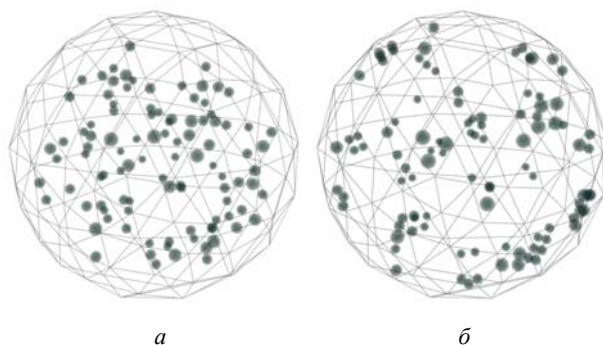


Рис. 10. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 10

Уменьшение объемной доли дисперсной фазы до $v_f = 0,01$ при переходе от системы № 9 к системе № 10 сопровождается более чем двукратным снижением плотности и однородности локальных участков системы (рис. 9). Изменение среднего квадратичного отклонения R_4 в процессе эволюции системы № 10 имеет другой характер: R_{4std} монотонно возрастает, приближаясь к установившемуся значению. Монотонное снижение однородности обусловлено доминирующим влиянием поля граничной сферы – доля частиц, образующих флоккулы, в системе № 10 значительно меньше, чем в системе № 9.

Преобладающее влияние граничной поверхности на эволюцию системы № 10 приводит к формированию структуры, однородность которой на протяжении всего эксперимента не меняется. Все частицы занимают положения, соответствующие минимуму потенциала граничной сферы, и только отдельные из них находятся в положениях, соответ-

ствующих минимуму потенциала парного взаимодействия (рис. 10).

Таким образом, полученные результаты позволяют считать, что в лиофобных системах образование флоккул под действием поля парного взаимодействия за время, сопоставимое со временем твердения композиционных материалов, возможно только в том случае, если расстояние r_o до минимума потенциала составляет более 50 нм (при $r_o < 50$ нм образование флоккул не наблюдается). При этом значение энергии U_o , соответствующее минимуму потенциала парного взаимодействия, оказывает меньшее влияние на процесс флокулообразования.

В высоконаполненных дисперсных системах эволюция протекает в стесненных условиях и завершается достижением ближайшего локального минимума суммарной потенциальной энергии. При этом конфигурация частиц меняется незначительно. Установившееся распределение частиц отличается достаточно высокой однородностью как локальных участков, так и системы в целом [3].

При снижении объемной доли дисперсной фазы до определенного предельного значения характер структурообразования изменяется. Процесс эволюции при уменьшении влияния стесненных условий можно разделить на несколько стадий. Начальная стадия завершается образованием слабо связных флоккул, которые на последующей стадии объединяются в непрерывный каркас. Для установившегося распределения частиц характерна высокая однородность локальных участков при малой однородности дисперсной системы в целом.

Дальнейшее снижение степени наполнения приводит к уменьшению количества частиц, входящих в состав флоккул. Установившееся распределение частиц в системе отличается малой однородностью.

Предложенный метод численного моделирования и анализа позволил установить влияние основных рецептурных факторов на процесс структурообразования лиофобных дисперсных систем и подтвердил адекватность полученных аналитических решений.

Библиографические ссылки

1. Моделирование процессов структурообразования дисперсных систем / А. Н. Бормотов [и др.] // Тр. Междунар. конф. «Идентификация систем и задачи управления» SICPRO'05 / Ин-т пробл. упр. – М., 2005. – С. 700–724.
2. Model of destruction and method for forecasting of composite materials resistance / A. N. Bormotov [et al.] // Proc. of the International Conference “Concrete Durability: Achievement and Enhancement”, University of Dundee, UK. – HIS BRE Press, 2008. – P. 345–356.
3. Полимерные композиционные материалы для защиты от радиации / Бормотов А. Н. [и др.]. – М.: Палеотип, 2006. – 270 с.

A. N. Bormotov, Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Penza State Technological Academy
I. A. Proshin, Doctor of Technical Sciences, Professor, Penza State Technological Academy
A. V. Vasilkov, OJSC Research-and-Production Enterprise “Rubin”

Computer Modeling of Evolution of Liofobic Systems Structurization

The system of computer and imitating modeling of the composites, including techniques of realization of numerical and natural experiment, methods of modeling of structurization, algorithms and a complex of the programs is offered. The system allows establishing influence of the basic mix and technology factors on process of liophilic disperse systems structurization and confirming adequacy of the received qualitative analytical decisions.

Key words: mathematical model, modeling, quality management, computer modeling, multicriterion synthesis, structurization (structure-forming), composite materials.

УДК 656.13

И. Н. Ефимов, доктор технических наук, профессор, Чайковский технологический институт (филиал) Ижевского государственного технического университета

А. В. Деревнин, аспирант, Чайковский технологический институт (филиал) Ижевского государственного технического университета

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ ПОТОКОВ С ПОМОЩЬЮ СЕТЕВЫХ ЗАДАЧ

Показано использование теории графов для описания дорожной сети в городских условиях, проведение необходимых натурных экспериментальных исследований и численный анализ построенной математической модели.

Ключевые слова: транспортный поток, моделирование, теория графов.

Основными негативными последствиями интенсивной автомобилизации, характерными для многих городов, являются: резкое снижение скорости движения, острый дефицит городских площадей для организации кратковременной и длительной стоянки автомобилей, транспортный шум, загрязнение окружающей среды, рост количества дорожно-транспортных происшествий [1–3].

Постоянное усложнение дорожно-транспортных условий требует непрерывного совершенствования методов и средств управления движением. В этой связи актуальными являются вопросы моделирования транспортных потоков для условий реальной городской сети, проведения экспериментальных исследований и анализа полученных результатов.

Важной характеристикой транспортной структуры является величина максимального потока дорожной сети. Для его определения представим улично-дорожную сеть как последовательность дорог и перекрестков в виде ориентированного графа [4–6]. Вершиной графа является внешняя граница перекрестка. Дуги показывают направление движения транспортного потока от одной границы перекрестка к другой (рис. 1).

Если движение транспорта в каком-либо направлении запрещено, то вершины не соединяются. Кроме того граф является циклическим, так как существует хотя бы один путь, в котором начальная вершина совпадает с конечной, при этом путь содержит как минимум одну дугу. Другими словами, существует путь, по которому можно выехать из начального пункта и вернуться обратно. Все необходимые характеристики городской сети записываются как параметры вершин или дуг графа. Маршрут, или путь представляет последовательность ребер, в котором каждые два соседних ребра имеют общую вершину.

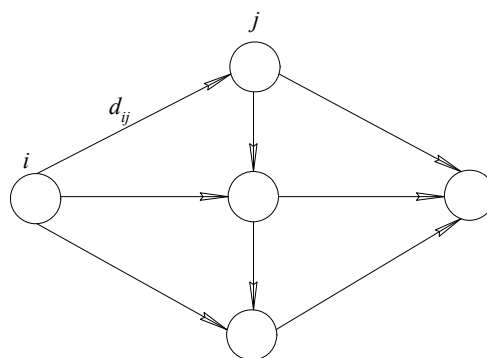


Рис. 1. Графическое представление элемента дорожной сети: i, j – вершины графа (перекрестки), d_{ij} – дуги (дороги)

Таким образом, описание транспортной сети как ориентированного графа позволяет ставить задачи определения различных показателей, характеризующих транспортную сеть и потоки на ней, описывая их как числовые функции на графе.

Пусть имеется некоторая сеть с заданной пропускной способностью дуг d_{ij} – из i -го узла в j -й узел. Необходимо так организовать движения, чтобы пропустить по сети максимальный поток из начального узла сети в конечный узел.

Обозначим через x_{ij} поток из i -го пункта в j -й пункт, $i, j = 1, 2, \dots, n$. Математическая модель задачи имеет вид

$$X = \sum_{i=1}^n x_{ij} \rightarrow \max; \quad (1)$$

$$\begin{cases} \sum_{k=0}^n x_{ki} - \sum_{j=1}^{n+1} x_{ij} = 0, \\ 0 \leq x_{ij} \leq d_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n. \end{cases} \quad (2)$$